

Е.П. Гордов, О.Б. Родимова, Ю.Е. Смирнов

## КАЧЕСТВЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СИСТЕМЫ УРАВНЕНИЙ ОЗОННОГО ЦИКЛА

Система дифференциальных уравнений для концентраций, описывающая озонный цикл Чепмена, анализируется с помощью методов качественного исследования динамических систем. Найден интеграл движения системы, что позволило свести ее к системе автономных уравнений на плоскости. Определены состояния равновесия данной системы в конечной части плоскости. С помощью преобразования Пуанкаре найдены особые точки на бесконечности. Исследование характеристических уравнений позволило установить характер поведения траекторий вблизи всех особых точек.

Показано, что различные приближения, применявшиеся ранее для упрощения уравнений озонного цикла, приводят к игнорированию многих качественных особенностей, присущих полной системе Чепмена.

1. Фотохимические реакции в атмосфере описываются с помощью систем дифференциальных уравнений для концентраций газовых составляющих. Подавляющее большинство исследований в настоящее время ведется в направлении учета дополнительных реагентов и детализации рассматриваемых процессов, т. е. увеличения числа уравнений и усложнения их структуры, см., например, [1–4]. Основным инструментом этих исследований является численное решение получающихся систем уравнений, и исследователь, задавая те или иные начальные условия, оказывается целиком во власти ЭВМ, не имея возможности заранее предвидеть качественные изменения в эволюции процесса. В то же время существуют и активно применяются в других областях физики методы качественного исследования систем дифференциальных уравнений, позволяющие делать выводы о наличии стационарных состояний и их устойчивости до решения громоздких систем уравнений. По-видимому, эти методы должны предвдывать громоздкий численный анализ и в атмосферно-оптических приложениях.

Мы рассмотрим с этой точки зрения простейший, однако, очень важный цикл атмосферных реакций – озонный цикл Чепмена [1–5, 10].



Здесь  $\kappa_2, \kappa_3$  – константы скоростей соответствующих реакций,  $J_2, J_3$  – скорости фотодиссоциации. Обозначим  $[\text{O}_2] = \tilde{x}$ ,  $[\text{O}] = \tilde{y}$ ,  $[\text{O}_3] = \tilde{z}$ . Система нелинейных дифференциальных уравнений для концентраций, описывающая (1) и получаемая стандартными методами химической кинетики, без учета диффузии имеет вид [1–5, 10] (здесь принято  $[\text{M}] = [\text{O}_2]$ ):

$$\dot{\tilde{x}} = -J_2\tilde{x} + J_3\tilde{z} - \kappa_2\tilde{x}^2\tilde{y} + 2\kappa_3\tilde{y}\tilde{z}; \quad (2a)$$

$$\dot{\tilde{y}} = 2J_2\tilde{x} + J_3\tilde{z} - \kappa_2\tilde{x}^2\tilde{y} - \kappa_3\tilde{y}\tilde{z}; \quad (2b)$$

$$\dot{\tilde{z}} = -J_3\tilde{z} + \kappa_2\tilde{x}^2\tilde{y} - \kappa_3\tilde{y}\tilde{z}. \quad (2c)$$

В данной работе исследованы стационарные состояния системы (2).

2. Система уравнений (2), включающая три независимых переменных  $\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z}$ , является достаточно сложной для анализа. Поэтому в предыдущих работах [1, 4–5] стремились уменьшить число переменных, исходя из физических соображений. Так, обычно используемое уравнение для концентрации озона  $\tilde{z}$  следует из (2) после введения ряда приближений. Основное приближение состоит в исключении из рассмотрения уравнения (2 а). В результате  $\tilde{z}$  удовлетворяет уравнению

$$\dot{\tilde{z}} = 2J_2\tilde{x} [1 - (\kappa_3J_3\tilde{z}^2)/(\kappa_2J_2\tilde{x}^3)]. \quad (3)$$

Устойчивость решений озонных уравнений исследовалась в работах [4, 5]. В [4] система двух уравнений вида (3) записана для двух, по высоте, слоев с учетом переноса между ними. Стационарное состояние является устойчивым узлом, однако некоторые режимы переноса могут приводить к появлению седла. В работе [5] анализировалась система уравнений (2 в), (2 с), записанная в виде

$$\begin{aligned}\dot{\tilde{y}} &= \tilde{d}(\tilde{z}) + \tilde{a}(\tilde{z})\tilde{z} - \tilde{b}y - \tilde{c}y\tilde{z}; \\ \dot{\tilde{z}} &= -\tilde{a}(\tilde{z})\tilde{z} + \tilde{b}y - \tilde{c}y\tilde{z}.\end{aligned}\quad (4)$$

Единственная стационарная точка является устойчивым узлом, не меняя своего характера при разумных вариациях параметров системы.

Следует, однако, отметить, что пренебрежение уравнением (2 а), общее для [4, 5], не оправдано математически. В самом деле, оно фактически предполагает  $\tilde{x} = \text{const}$ . Но  $\tilde{x} = \text{const}$  означает  $\dot{\tilde{x}} = 0$ , т.е. ограничение на значение  $\tilde{y}$  и  $\tilde{z}$ , которое должно быть учтено при решении системы для  $\tilde{y}$  и  $\tilde{z}$ . Такая процедура известна как осуществление принципа подчинения [6], причем в данном случае  $\tilde{x}$  является подчиненной переменной. Вопрос о том, какая переменная может считаться подчиненной, должен решаться, исходя из значений параметров, входящих в систему. Если перейти к безразмерным переменным с помощью замены

$$t = \alpha \tilde{t}, \quad x = \beta \tilde{x}, \quad y = \gamma \tilde{y}, \quad z = \delta \tilde{z}, \quad (5)$$

где

$$\alpha = \frac{J_2 \kappa_3}{J_3} \sqrt{\frac{J_2}{\kappa_3}}, \quad \beta = \frac{\kappa_2 J_2}{\kappa_3 J_3}, \quad \gamma = \frac{\kappa_3}{J_3}, \quad \delta = \frac{J_3^2 \kappa_2}{J_2^2 \kappa_3},$$

то система (2) примет вид

$$\begin{aligned}\dot{x} &= b(-x + z - x^2 y + 2yz) \equiv P_1(x, y, z); \\ \dot{y} &= b^{-1}(2x + z - x^2 y - yz) \equiv Q_1(x, y, z); \\ \dot{z} &= c(-z + x^2 y - yz) \equiv R_1(x, y, z),\end{aligned}\quad (6)$$

где  $b = \frac{J_3}{\kappa_3} \sqrt{\frac{\kappa_2}{J_2}}$ ,  $c = bJ_3/J_2$ . Для высоты  $\sim 30$  км значения концентраций из [3] дают  $b \sim 7,6$ ,  $b^{-1} \sim 0,13$ ,  $c \sim 5,6 \cdot 10^7$ , что позволяет считать подчиненной переменной скорее  $z$ , чем  $x$ . И тот, и другой вариант, будучи реализованными для системы (6), приводят к уравнению для одной переменной, имеющему степень 2 в случае  $\dot{x} = 0$  и степень 4 в случае  $\dot{z} = 0$ . Оба уравнения имеют бифуркационные точки. Таким образом, более детальное рассмотрение системы (2) обнаруживает наличие достаточно богатой качественной структуры. Вопрос о том, в какой мере эта структура обусловлена используемыми приближениями, может быть решен при анализе системы (2) в целом.

3. Состояния равновесия системы (6) должны быть определены из уравнений

$$P_1 = 0, \quad Q_1 = 0, \quad R_1 = 0.$$

Их решение дает следующие соотношения между координатами состояний равновесия:

$$x = (1 + y)/y^2, \quad z = (1 + y)/y^3, \quad x = yz, \quad (7)$$

что заставляет предположить наличие у системы (6) интеграла движения. Таким интегралом движения является величина  $A$ :

$$A = \frac{2c}{b} x + 3z + bcy = \text{const}. \quad (8)$$

Действительно, это легко проверить, используя (6),

$$dA/dt = 0. \quad (9)$$

Благодаря наличию интеграла движения, анализ системы (2) и далее системы (6) в целом радикально упрощается. Учет (8) позволяет свести систему (6) фактически к системе двух уравнений. Так, выжая  $y$  из (8), получаем систему уравнений для  $x$  и  $z$ :

$$\begin{aligned} \dot{x} &= -bx + \left(b + \frac{2A}{c}\right)z + \frac{2}{b}x^3 + \frac{3}{c}x^2z - \frac{4}{b}xz - \frac{6}{c}z^2 - Ax^2 \equiv P(x, z); \\ \dot{z} &= -\left(c + \frac{A}{b}\right)x + \frac{A}{b}x^2 - \frac{2c}{b^2}x^3 - \frac{3}{b}x^2z + \frac{2c}{b^2}xz + \frac{3}{b}z^2 \equiv Q(x, z). \end{aligned} \quad (10)$$

Наша задача сводится, таким образом, к системе двух автономных дифференциальных уравнений, рассматриваемых на плоскости  $(x, z)$ . Такие системы представляют собой простейший объект качественного исследования и наиболее хорошо изучены, см., например, [8, 9]. Решения системы типа (10) определяют в плоскости  $(x, z)$  кривые, называемые траекториями. Траектории могут либо занимать ограниченную часть плоскости, либо «уходить» в бесконечность. Могут существовать семейства замкнутых траекторий, а также изолированные замкнутые траектории. Уравнения

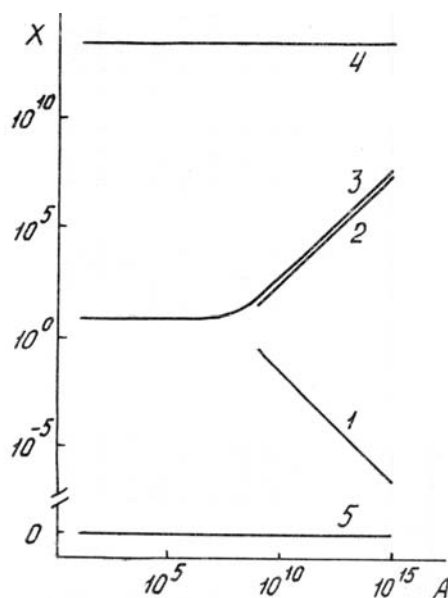
$$P(x, z) = 0, Q(x, z) = 0 \quad (11)$$

определяют состояния равновесия или так называемые особые точки системы (10). Каждая особая точка является отдельной траекторией. Таким образом, задание системы (10) означает задание разбиения плоскости на траектории. Нахождение этого разбиения и составляет предмет качественного исследования. Исследование состояний равновесия — часть этой программы. Полностью ее предполагается осуществить в будущем.

Прежде всего, встает вопрос о нахождении особых точек, удовлетворяющих (11). Уравнение для нахождения координат  $x$  состояний равновесия, полученное из (10), имеет вид

$$x^5 + \frac{2c}{9b^2}(3b - 2c)x^4 + \frac{1}{9b}(4Ac - 3Ab + 6b^2c)x^3 + \frac{1}{9}(3bc - 2c^2 - A^2)x^2 + \frac{bc}{9}(bc + A)x = 0. \quad (12)$$

Одно из состояний равновесия есть  $x_5 = 0$ , другие получаются как решения алгебраического уравнения 4-й степени, следующего из (12). Уравнение (12) решалось численно, причем величина  $A$  рассматривалась как параметр. Корни уравнения (12) в зависимости от  $A$  приведены на рисунке, который фактически является бифуркационной диаграммой. При  $A \approx 10^9$  имеется пять вещественных корней. При  $A \lesssim 10^8$  два из них ( $x_1$  и  $x_2$ ) становятся комплексными.



Зависимость координат равновесных состояний от параметра  $A$ . Кривые 1–5 отвечают состояниям  $x_1$ – $x_5$  соответственно

Вычисленные соответственно равновесным значениям  $x$  значения концентрации  $y$  и  $z$  (см. табл. 1) оказываются отрицательными для  $x_3, x_4$ . Таким образом, физически возможными ситуациями могут соответствовать  $x_1, x_2, x_5$ . Из них, при значении  $A = 8,86 \cdot 10^{13}$ , отвечающем атмосферным концентрациям  $O_2, O, O_3$  ( $\tilde{x} = 7,32 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$ ,  $\tilde{y} = 6,75 \cdot 10^7 \text{ см}^{-3}$ ,  $\tilde{z} = 3,96 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-3}$  [3]), только  $x_2$

может претендовать на роль реального состояния равновесия. (Как известно, значения концентрации озона, полученные для чисто кислородной атмосферы (см. (2)) отличаются от реальных примерно на порядок. Наше значение  $z_2$  близко к полученному в [10]).

Для определения характера состояний равновесия в данном случае достаточно рассмотреть линейное приближение системы (10). Поведение траекторий вблизи особых точек определяется значениями корней характеристического уравнения

$$\lambda^2 - T\lambda + \Delta = 0, \quad (13)$$

вычисленных в соответствующих состояниях равновесия. В формуле (13)

$$T = a_{11} + a_{22}, \quad \Delta = a_{11} a_{22} - a_{12} a_{21}, \quad D = T^2 - 4\Delta = (a_{11} - a_{22})^2 + 4 a_{12} a_{21}$$

и

$$a_{11} = \partial P / \partial x, \quad a_{12} = \partial P / \partial z, \quad a_{21} = \partial Q / \partial x, \quad a_{22} = \partial Q / \partial z. \quad (14)$$

Для точки  $x_5 = 0$ ,  $y_5 = A/bc$ ,  $z_5 = 0$  имеем  $T < 0$ ,  $\Delta > 0$ ,  $D > 0$ , и  $\lambda_1 < 0$ ,  $\lambda_2 < 0$  определяют устойчивый узел. Остальные состояния равновесия являются седлами ( $\lambda_1 < 0$ ,  $\lambda_2 > 0$ ). Их характер не меняется при изменении  $A$ . Направления сепаратрис седел вблизи состояний равновесия также могут быть легко найдены. Их угловые коэффициенты направления  $\kappa_1$ ,  $\kappa_2$  ( $\kappa = \lim_{t \rightarrow \infty} dz/dx$ ) связаны с характеристическими корнями.

$$\kappa_1 = (\lambda_1 - a_{11})/a_{12}, \quad \kappa_2 = (\lambda_2 - a_{11})/a_{12}. \quad (15)$$

Значения  $k$  для ряда равновесных состояний содержатся в табл. 2.

4. Состояния равновесия вместе со своими сепаратрисами могут быть изображены на плоскости  $(x, z)$ . Это, однако, не определяет полностью поведение траекторий. Существенную информацию о траекториях дает также исследование поведения системы в бесконечно удаленных точках плоскости.

Для изучения поведения системы на бесконечности вся плоскость  $(x, z)$  с помощью преобразования Пуанкаре [8, 9] отображается на внутренность круга. При этом точки окружности  $K$  отвечают бесконечно удаленным точкам плоскости, особые же точки системы отображаются во внутренние точки круга, сохраняя свой характер. Помимо наглядности, такое отображение дает дополнительные сведения о траекториях, благодаря появлению новых особых точек на окружности  $K$ .

Преобразование Пуанкаре  $(x, z \rightarrow u, z')$  имеет вид

$$x = 1/z', \quad z = u/z' \quad (16)$$

Дополнительные особые точки получаются из преобразованных к новым координатам  $(u, z')$  уравнений (10) при условии  $z' = 0$ . Таких точек две:  $(u_1, z' = 0)$ ,  $(u_2, z' = 0)$ .

$$u_1 = -2c/3b, \quad \lambda_1 = -1/b, \quad \lambda_2 = 0; \quad (17)$$

$$u_2 = -c/b, \quad \lambda_1 = \lambda_2 = 1/b.$$

Корни характеристических уравнений для этих точек, приведенные в (17), классифицируют  $u_1$  как топологический узел [8] и  $u_2$  как вырожденный неустойчивый узел. Сама окружность  $K$  также является траекторией.

Исследование бесконечно удаленных точек оси  $z$ , т.е. точек на окружности, в которые проектируются концы оси  $z$ , требует другого преобразования

$$x = v/z', \quad z = 1/z'. \quad (18)$$

Точка  $(v = 0, z' = 0)$  является особой точкой уравнений (10), записанных в координатах (18). Ей отвечают характеристические корни  $\lambda_1 = \lambda_2 = 0$ . Более подробное исследование обнаруживает, что она имеет характер седло-узла.

Таблица 1

Значения равновесных концентраций,  
 $x \sim [O_2], y \sim [O], z \sim [O_3]$

A	$x_1$	$y_1$	$z_1$	$x_2$	$y_2$	$z_2$	$x_3$	$y_3$	$z_3$
$10^8$	c	c	c	c	c	c	1,37+1	-2,36-1	-5,81+1
$10^9$	6,23-1	2,30+0	2,70-1	6,41+1	1,33-1	4,82+2	7,13+1	-1,12-1	-6,38+2
$10^{10}$	4,49-2	2,32+1	1,93-3	6,79+2	3,91-2	1,74+4	6,81+2	-3,76-2	-1,81+4
$10^{11}$	4,32-3	2,32+2	1,86-5	6,80+3	1,22-2	5,57+5	6,80+3	-1,20-2	-5,64+5
$10^{12}$	4,30-4	2,32+3	1,85-7	6,80+4	3,84-3	1,77+7	6,80+4	-3,83-3	-1,78+7
$10^{13}$	4,30-5	2,32+4	1,99-9	6,80+5	1,21-3	5,60+8	6,80+5	-1,21-3	-5,61+8
$8,857 \cdot 10^{13}$	4,86-6	2,06+5	2,36-11	6,02+6	4,08-4	1,48+10	6,03+6	-4,07-4	-1,48+10
$10^{14}$	4,30-6	2,32+5	1,85-11	6,80+6	3,84-4	1,77+10	6,81+6	-3,83-4	-1,78+10
$10^{15}$	4,30-7	2,32+6	1,85-13	6,79+7	1,21-4	5,59+11	6,81+7	-1,21-4	-5,62+11

$x_4$   $y_4$   $z_4$

2,40+13 -2,04-7 -1,18+20

Примечания. c — комплексное число,  $6,23-1 \equiv 6,23 \cdot 10^{-1}$ .

Таблица 2

Угловые коэффициенты направлений сепаратрис сёдел

A	$x_1$	$\kappa_1$	$\kappa_2$	$x_2$	$\kappa_1$	$\kappa_2$	$x_3$	$\kappa_1$	$\kappa_2$
$10^9$	6,23-1	8,69-1	-4,33+6	6,41+1	3,99+6	-1,06+7	7,13+1	1,11+7	-1,96+7
$10^{10}$	4,49-2	8,60-2	-3,75+6	6,79+2	8,86+8	-8,93+8	6,81+2	1,08+9	-1,09+9
$10^{11}$	4,32-3	8,60-3	-3,68+6	6,80+3	7,30+10	-7,30+10	6,80+3	7,58+10	-7,58+10
$10^{12}$	4,30-4	8,60-4	-3,68+6	6,80+4	2,97+11	-2,97+11	6,80+4	2,94+11	-2,94+11
$10^{13}$	4,30-5	8,60-5	-3,68+6	6,80+5	3,05+11	-3,05+11	6,80+5	3,04+11	-3,04+11
$10^{14}$	4,30-6	8,60-6	-3,68+6	6,80+6	3,05+11	-3,05+11	6,80+6	3,05+11	-3,05+11
$10^{15}$	4,30-7	8,59-7	-3,68+6	6,79+7	3,05+11	-3,05+11	6,81+7	3,05+11	-3,05+11

$x_4$   $\kappa_1$   $\kappa_2$

2,40+13 3,05+11 -3,05+11

рый должен ответить на вопрос о наличии изолированных замкнутых траекторий и выявить те изменения в структуре исследуемых уравнений, которые могут привести к качественному изменению поведения решений.

1. Мак-Ивен М., Филипс Л. Химия атмосферы. — М.: Мир, 1978. — 376 с.
2. Crutzen P.J., Schmailzl U. — Planet Space Sci., 1983, v. 31, № 9, p. 1009.
3. Shimazaki T. — J. Am. Terr. Phys., 1984, v. 46, № 2, p. 173.
4. Karol I. L. — Pure and Appl. Geophys., 1980, v. 118, № 3, p. 695.
5. Шабалова М. В. — Труды ГГО, 1985, вып. 494, с. 77.
6. Хакен Г. Синергетика. — М.: Мир, 1985. — 420 с.
7. Постон Т., Стюарт И. Теория катастроф и ее приложения. — М.: Мир, 1980. — 608 с.
8. Андронов А. А., Леонтович Е. А., Гордон И. И., Майер А. Г. Качественная теория динамических систем второго порядка. — М.: Наука, 1966. — 568 с.
9. Баутин Н. Н., Леонтович Е. А. Методы и приемы качественного исследования динамических систем на плоскости. — М.: Наука, 1976. — 496 с.
10. Hunt B. G. — J. Geophys. Res., 1966, v. 71, № 5, p. 1385.

Институт оптики атмосферы  
СО АН СССР, Томск

Поступила в редакцию  
15 марта 1988 г.

Е. Р. Gordov, О. В. Rodimova, Ju. E. Smirnov. **Qualitative Investigation of Ozone Cycle Coupled Equation.**

A differential equation system for concentrations describing Chapman's ozone cycle is analyzed by means of the qualitative investigation methods. The integral of motion is found, that allows one to reduce the system to that of dynamic equations on a plane. The steady states are determined in the finite part of the plane and those at infinity are found using Poincaré's transformation. The trajectory behaviour in the vicinity of all the steady states is obtained through the characteristic equations. It is shown that the approximations used earlier for simplifying the ozone cycle equations fail to account for the qualitative features inherent in the entire Chapman's system.